Corso di Laurea in Ingegneria Gestionale

Sede di Fermo

Corso di Calcolo Numerico

5 - INTEGRAZIONE NUMERICA

Lucio Demeio
DIISM

Introduzione

Idea di base

- Spesso si devono calcolare integrali del tipo

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

  quando non si conosce una primitiva della f o la f stessa è nota solo su un insieme discreto di punti (nodi).
- L'integrale viene allora approssimato, con varie tecniche e varie metodologie, da opportune somme di Riemann, del tipo

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i\, f(x_i).$$

  accompagnate da una stima dell'errore.
- Le formule che si ottengono si chiamano **formule** (o regole) **di quadratura**.

Formule di Newton-Cotes

Regola dei trapezi

La metodologia che illustreremo è quella di utilizzare il polinomio interpolatore di Lagrange con un numero adeguato di nodi. Iniziamo con il caso più elementare, con 2 nodi, $x_0 = a$ ed $x_1 = b$. Il polinomio interpolatore con resto è in tal caso

$$f(x) = f(x_0)\,\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1)\,\frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + \frac{(x - x_0)\,(x - x_1)}{2}\,f''(\xi(x))$$

ed integrando si ottiene, dopo qualche passaggio,

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\,[f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{12}\,f''(\xi)$$

dove $h = x_1 - x_0 = b - a$ e l'ultimo termine è stato ottenuto applicando il teorema della media pesata sull'integrale

$$\int_{x_0}^{x_1} \frac{(x - x_0)\,(x - x_1)}{2}\,f''(\xi(x))dx$$

Formule di Newton-Cotes

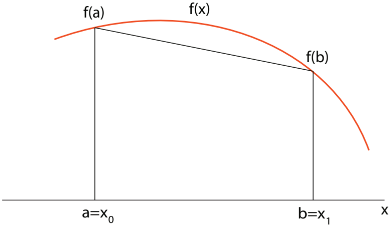
Regola dei trapezi

L'approssimazione ottenuta per questa via è dunque

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\,[f(x_0)+f(x_1)]$$

che viene detta **regola del trapezio**, in quanto consiste nel sostituire l'area vera sottesa dalla curva con il trapezio in figura.

Formula dei trapezi



Formule di Newton-Cotes

Regola di Simpson

- L'approssimazione successiva si ha utilizzando 3 nodi, con $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$ ed $x_2 = b$. In tal caso è conveniente, invece di seguire la strada del polinomio interpolatore di Lagrange, di sviluppare $f(x)$ con il polinomio di Taylor al terz'ordine attorno ad x_1.
- Abbiamo allora:

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x - x_1)^2 + \frac{f'''(x_1)}{6}(x - x_1)^3 + \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{24}(x - x_1)^4$$

  dove $\xi(x) \in (x_0, x_2)$.
- Integrando questa espressione, applicando il teorema della media pesata sull'ultimo termine ...

Formule di Newton-Cotes

Regola di Simpson

- ... notando che

$$\int_{x_0}^{x_2} (x - x_1)\, dx = \int_{x_0}^{x_2} (x - x_1)^3\, dx = 0$$

- ed utilizzando per la derivata seconda l'approssimazione

$$f''(x_1) = \frac{f(x_0) - 2\, f(x_1) + f(x_2)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\, f^{(4)}(\xi)$$

- abbiamo, dopo qualche semplice passaggio,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\, dx = \frac{h}{3}\, \left[f(x_0) + 4\, f(x_1) + f(x_2) \right] - \frac{h^5}{90}\, f^{(4)}(\xi)$$

Formule di Newton-Cotes

Regola di Simpson

L'approssimazione ottenuta per questa via è dunque

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\,\left[f(x_0) + 4\,f(x_1) + f(x_2)\right]$$

che viene detta **regola di Simpson**.

Formule di Newton-Cotes

Grado di accuratezza

- Nella regola dei trapezi, l'errore è proporzionale alla derivata seconda, quindi la regola dei trapezi è esatta per polinomi di grado zero e grado uno;
- Nella regola di Simpson, l'errore è proporzionale alla derivata quarta, quindi la regola è esatta per polinomi fino al terzo grado.
- Il **grado di accuratezza** di una formula di quadratura è il grado del polinomio di grado massimo per cui la formula è esatta. La regola dei trapezi ha grado di precisione uno, la regola di Simpson tre.

Formule di Newton-Cotes

Formula aperte e formule chiuse

- Le formule di quadratura appena viste sono esempi di formule dette di **Newton-Cotes** e sono dette **formule chiuse** perchè gli estremi dell'intervallo sono inclusi nei nodi. Esistono anche **formule aperte** (estremi non inclusi), che per ora lasciamo stare.
- Esempi numerici:
  Mathematica file Integrazione1.nb

Formule di Newton-Cotes composste

Quando l'intervallo d'integrazione $[a, b]$ è troppo grande o la funzione varia molto all'interno dell'intervallo, le formule viste in precedenza, applicate al singolo intervallo, non danno più una buona approssimazione all'integrale. Si ricorre allora alla metodologia seguente: si suddivide l'intervallo $[a, b]$ in tanti piccoli intervallini ed a ciascuno di essi vengono applicate le formule di Newton-Cotes (chiuse). Illustriamo questa tecnica, che è quella più usata nell'integrazione numerica, prima nel caso della regola dei trapezi e poi a quella di Simpson.

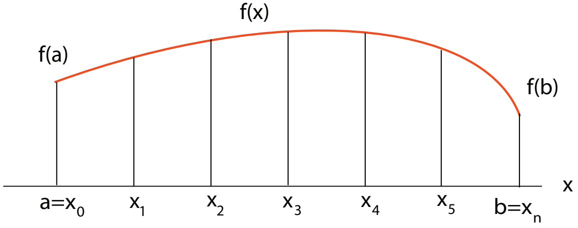
Formule di Newton-Cotes composte

Regola dei trapezi

Sia

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

l'integrale da calcolare. Introduciamo una decomposizione dell'intervallo $[a,b]$ costituita da $n+1$ nodi $x_0 = a, x_1, ..., x_n = b$ che supponiamo equispaziati, con passo di discretizzazione $h = (b-a)/n$, cioè $x_{j+1} = x_j + h$.



Formule di Newton-Cotes composte

Regola dei trapezi

Abbiamo ovviamente:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + ... + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx$$
$$= \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)\,dx.$$

A ciascun intervallino applichiamo ora la regola dei trapezi, completa dell'errore. Otteniamo:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2} \sum_{j=1}^{n} \left[f(x_{j-1}) + f(x_j)\right] - \frac{h^3}{12} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j)$$

con ξ_j un punto opportuno nell'intervallo $[x_{j-1}, x_j]$.

Formule di Newton-Cotes composte

Regola dei trapezi

- Esplicitiamo la prima sommatoria:

$$\sum_{j=1}^{n} [f(x_{j-1}) + f(x_j)] = [f(x_0) + f(x_1)] + [f(x_1) + f(x_2)] + [f(x_2) + f(x_3)] + ... + [f(x_{n-2}) + f(x_{n-1})] + [f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

$$= f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(x_n)$$

- Il primo termine complessivamente quindi è

$$\frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right]$$

Formule di Newton-Cotes composte

Regola dei trapezi

- Per ottenere una stima dell'errore, supponiamo che f sia di classe C^2 in $[a, b]$. Indicando con m ed M rispettivamente il minimo ed il massimo di f'' in $[a, b]$, si ha:

$$\sum_{j=1}^{n} m \leq \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) \leq \sum_{j=1}^{n} M$$

$$n\, m \leq \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) \leq n\, M$$

$$m \leq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) \leq M$$

Formule di Newton-Cotes composte

Regola dei trapezi

- Per il teorema dei valori intermedi, esiste pertanto $\xi \in [a, b]$ tale che

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) = f''(\xi)$$

- e quindi

$$\frac{h^3}{12} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) = \frac{h^2}{12} \frac{b-a}{n} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) = \frac{b-a}{12} \, h^2 \, f''(\xi)$$

Formule di Newton-Cotes composste

Regola dei trapezi

La regola dei trapezi porta dunque alla formula composta

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right] - \frac{b-a}{12}\,h^2\,f''(\xi).$$

Vediamo che l'errore è quadratico nel passo di discretizzazione h.

Formule di Newton-Cotes composte

Regola di Simpson

- Introduciamo anche in questo caso una decomposizione dell'intervallo $[a, b]$ costituita da $n+1$ nodi $x_0 = a, x_1, ..., x_n = b$ equispaziati, con passo di discretizzazione $h = (b-a)/n$, cioè $x_{j+1} = x_j + h$, solo che questa volta n **deve essere pari**.
- Questa volta scriviamo:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + ... + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx$$
$$= \sum_{j=1}^{n/2} \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)\,dx.$$

cioè accoppiamo gli intervallini a due a due. A ciascun doppio intervallino applichiamo ora la regola di Simpson, completa dell'errore.

Formule di Newton-Cotes composte

Regola di Simpson

- Otteniamo:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\sum_{j=1}^{n/2}\left[f(x_{2j-2}) + 4\,f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})\right] - \frac{h^5}{90}\sum_{j=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_j)$$

con ξ_j un punto opportuno nell'intervallo $[x_{2j-2}, x_{2j}]$.

Formule di Newton-Cotes composte

Regola di Simpson

- Esplicitiamo la prima sommatoria:

$$\sum_{j=1}^{n/2} \left[f(x_{2j-2}) + 4\,f(x_{2j-1}) + f(x_{2j}) \right]$$
$$= \left[f(x_0) + 4\,f(x_1) + f(x_2) \right] + \left[f(x_2) + 4\,f(x_3) + f(x_4) \right]$$
$$... + \left[f(x_{n-2}) + 4\,f(x_{n-1}) + f(x_n) \right]$$

- Il primo termine complessivamente quindi è

$$\frac{h}{3}\ \Big[f(a) + 4\,f(x_1) + 2\,f(x_2) + 4\,f(x_3) + ...$$
$$+ 2\,f(x_{n-2}) + 4\,f(x_{n-1}) + f(b) \Big]$$

Formule di Newton-Cotes composste

Regola di Simpson

Per ottenere una stima dell'errore, supponiamo che f sia di classe C^4 in $[a, b]$ e procediamo come per la regola dei trapezi. Otteniamo alfine:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\,\left[f(a) + 4\,f(x_1) + 2\,f(x_2) + 4\,f(x_3) + \ldots\right.$$

$$\left. + 2\,f(x_{n-2}) + 4\,f(x_{n-1}) + f(b)\right] - \frac{b-a}{180}\,h^4\,f^{(4)}(\xi)$$

per un opportuno $\xi \in [a, b]$. Vediamo che l'errore è del quart'ordine nel passo di discretizzazione h.

Formule di Newton-Cotes composste

Formule di quadratura

- La formule composte basate sulla regola dei trapezi e sulla regola di Simpson si possono scrivere nella forma di una somma pesata sui valori della funzione ai nodi:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{j=0}^{n} w_j\, f(x_j)$$

  dove i coefficienti w_j sono detti **pesi** della formula di quadratura.
- Nel caso della regola dei trapezi abbiamo $w_0 = w_n = h/2$, $w_j = h$, per $j \neq 0, n$;
- per la regola di Simpson abbiamo invece $w_0 = w_n = h/3$, $w_j = 4h/3$ per $j \neq 0, n$ e j pari, $w_j = 2h/3$ per $j \neq 0, n$ e j dispari (ricordiamo che per questa regola di quadratura n deve essere pari).

Formule di Newton-Cotes composte

Formule di quadratura

- Menzioniamo infine (senza ricavarla) la formula $3/8$ di Simpson, per la quale n deve essere un multiplo di 3: $w_0 = w_n = 3\,h/8$, $w_1 = w_2 = 9\,h/8$, $w_4 = 3\,h/4$, $w_5 = w_6 = 9\,h/8$, $w_7 = 3\,h/4$, ...,$w_{n-3} = 2$, $w_{n-2} = w_{n-1} = 9\,h/8$. Anche in questo caso l'errore è del quart'ordine nel passo h.

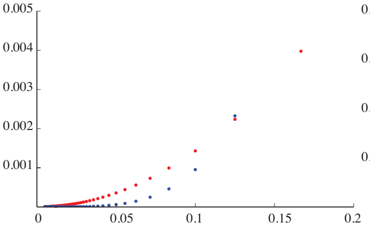
Formule di Newton-Cotes composste

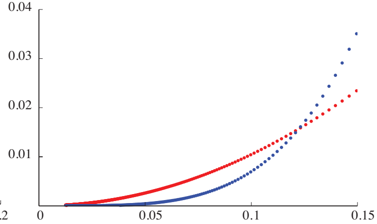
Confronto fra le quadrature dei trapezi e di Simpson

- Da calcolare

$$\int_0^1 e^x \, dx \qquad \int_0^{2\pi} x \, \sin x \, dx$$

- errore (in funzione di h) per i trapezi (rosso), e per Simpson (blu $*1000$):





Metodo di Romberg

Idea di base

Il metodo di Romberg è una tecnica per accelerare la convergenza delle formule di quadratura. Si basa sull'applicazione dell'estrapolazione di Richardson al metodo dei trapezi; il passo di discretizzazione del metodo dei trapezi viene dimezzato ad ogni iterazione.

Idea di base

Sia, come al solito,

$$I = \int_a^b f(x)\, dx$$

l'integrale da calcolare. Supponiamo, almeno per ora, $f \in C^\infty[a, b]$ e consideriamo la regola dei trapezi (non composta, per ora) sull'intervallo $[a, b]$:

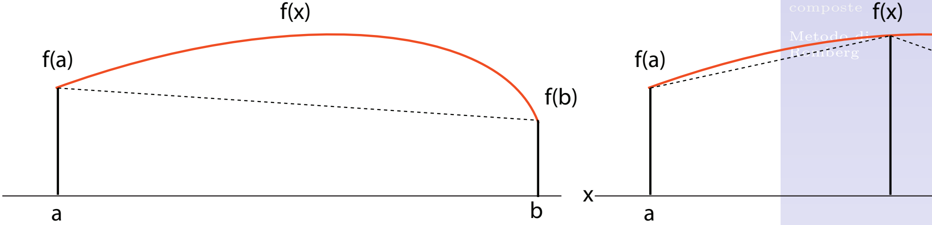
$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \frac{h}{2}\, [f(a) + f(b)]$$

dove $h = b - a$.

Metodo di Romberg

Iterazioni successive dei trapezi

Consideriamo ora applicazioni successive della regola dei trapezi, con il passo dimezzato ad ogni iterazione:



- Il passo ad ogni iterazione risulta allora $h_k = (b-a)/2^{k-1}$, con $k=1$ che corrisponde alla regola dei trapezi applicata su tutto l'intervallo e $h_{k+1} = h_k/2$;
- ad ogni iterazione si aggiungono nuovi punti alla decomposizione dell'intervallo.

Metodo di Romberg

Lucio Demeio
DIISM

Iterazioni successive dei trapezi

- Usando la formula composta alla k-esima iterazione abbiamo dunque, con $m = 2^{k-1}$ (numero degli intervalli alla $k-$esima iterazione),

$$I = \frac{h_k}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) + f(b) \right] - \frac{b-a}{12} \, h_k^2 \, f''(\xi).$$

- Non è difficile dimostrare che l'errore che compare sopra può essere scritto nella forma di una serie di potenze del tipo $K_1 \, h_k^2 + K_2 \, h_k^4 + ... = \sum_{j=1}^{\infty} K_j \, h^{2j}$.
- Introducendo

$$R_{k1} = \frac{h_k}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) + f(b) \right]$$

Metodo di Romberg

Iterazioni successive dei trapezi

- ... possiamo allora scrivere

$$I = R_{k1} + K_1 \, h_k^2 + K_2 \, h_k^4 + ...$$

- Il calcolo di R_{k1} non richiede il calcolo della funzione su tutti i nodi che compaiono nella sommatoria, ma soltanto sui nodi che non erano presenti nell'iterazione precedente.
- In particolare:

$$R_{k1} = \frac{h_k}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j \in \mathcal{N}_1} f(x_j) + f(b) + 2 \sum_{j \in \mathcal{N}_2} f(x_j) \right] = ...$$

Metodo di Romberg

Iterazioni successive dei trapezi

- $$\begin{aligned} \ldots &= \frac{1}{2}\frac{h_{k-1}}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j\in\mathcal{N}_1} f(x_j) + f(b)\right] + h_k \sum_{j\in\mathcal{N}_2} f(x_j) \\ &= \frac{1}{2} R_{k-1,1} + h_k \sum_{j\in\mathcal{N}_2} f(x_j) \end{aligned}$$

  dove $\mathcal{N}_1$ ed $\mathcal{N}_2$ sono gli insiemi di indici corrispondenti rispettivamente ai vecchi nodi ed ai nuovi nodi.
- La relazione appena trovata fornisce una relazione di ricorrenza per le R_{k1}. Dalle prime due iterazioni, ...

Metodo di Romberg

Iterazioni successive dei trapezi

$$
\begin{aligned}
R_{11} &= \frac{b-a}{2}\,\left[f(a)+f(b)\right]\\
R_{21} &= \frac{b-a}{4}\,\left[f(a)+f(b)+2\,f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right]\\
&= \frac{1}{2}\,R_{11}+\frac{b-a}{2}\,f\left(\frac{a+b}{2}\right)
\end{aligned}
$$

ricostruiamo le iterazioni successive.

Metodo di Romberg

Estrapolazione di Richardson

- Riprendiamo l'espressione scritta in precedenza

$$I = R_{k1} + K_1\, h_k^2 + K_2\, h_k^4 + \ldots$$

- e mettiamola a sistema con la stessa calcolata all'iterazione $k+1$, ricordando che $h_{k+1} = h_k/2$:

$$\begin{aligned} I &= R_{k1} + K_1\, h_k^2 + K_2\, h_k^4 + \ldots \\ I &= R_{k+1,1} + K_1\, \frac{h_k^2}{4} + K_2\, \frac{h_k^4}{16} + \ldots \end{aligned}$$

- Moltiplicando la seconda per 4 e sottraendo si elimina il termine quadratico in k (come già visto in precedenza a proposito dell'estrapolazione di Richardson).

Metodo di Romberg

Estrapolazione di Richardson

- Ricavando I:

$$I = \frac{4\,R_{k+1,1} - R_{k1}}{3} - \frac{1}{4}\,h_k^4 + ...$$

- Definendo

$$R_{k2} = \frac{4\,R_{k1} - R_{k-1,1}}{3} = R_{k1} + \frac{R_{k1} - R_{k-1,1}}{3}$$

abbiamo

$$I = R_{k2} - \frac{1}{4}\,h_k^4 + ...$$

per $k = 1, 2, ..., 2^{k-1}$, ottenendo così un'approssimazione con errore del quart'ordine.

Metodo di Romberg

Estrapolazione di Richardson

- Il procedimento di estrapolazione può essere continuato ulteriormente, secondo la relazione di ricorrenza

$$R_{kj} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

- che si può riassumere nella tabella

$$\begin{array}{cccccc}
R_{11} & & & & & \\
R_{21} & R_{22} & & & & \\
R_{31} & R_{32} & R_{33} & & & \\
R_{41} & R_{42} & R_{43} & R_{44} & & \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & & \\
R_{n1} & R_{n2} & R_{n3} & R_{n4} & \ldots & R_{nn}
\end{array}$$

Metodo di Romberg

Conclusioni

- Il criterio di arresto può essere stabilito sulla base di un numero massimo di iterazioni o di una tolleranza;
- il test sulla tolleranza viene di solito eseguito (per sicurezza) sugli ultimi tre elementi diagonali.
- Esempi numerici: **Mathematica file: Integrazione3.nb**.